

Przebieg egzaminu magisterskiego dla kierunku Zastosowania fizyki w biologii i medycynie, specjalność Projektowanie molekularne i bioinformatyka

W trakcie egzaminu magisterskiego student udziela ustnych odpowiedzi na trzy pytania zadane przez komisję egzaminacyjną.

Pierwsze pytanie dotyczy zagadnień związanych bezpośrednio z pracą magisterską i jest poprzedzone zaprezentowaniem przez studenta głównych tez pracy magisterskiej. Prezentacja nie powinna trwać dłużej niż 10 minut.

Drugie pytanie dotyczy zagadnień związanych z wybraną przez studenta specjalnością studiów.

Trzecie pytanie dotyczy zagadnień ogólnych w zakresie studiów i jest losowane z poniższej listy zatwierdzonej przez Radę Wydziału.

Zagadnienia na egzamin magisterski na Wydziale Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego dla kierunek Zastosowania fizyki w biologii i medycynie, specjalność Projektowanie molekularne i bioinformatyka

Przedstawiona poniżej lista zagadnień na egzamin magisterski obejmuje problemy, które omawiane były, w różnym stopniu zaawansowania, w ramach zajęć obowiązkowych studiów II stopnia. Część zagadnień wkracza w obszary specyficzne dla prac badawczych realizowanych w Zakładzie Biofizyki IFD Wydziału Fizyki UW oraz w Instytucie Informatyki, Wydziału Matematyki, Informatyki i Mechaniki UW, jak również dotyczy osiągnięć biofizyki teoretycznej i bioinformatyki XXI wieku.

Jednym z elementów egzaminu magisterskiego studenta jest omówienie wylosowanego przez niego zagadnienia zawartego w poniższej liście. Oczekuje się, że student będzie potrafił omówić zagadnienie w szerokim aspekcie. Komisja egzaminacyjna ma prawo podjęcia dyskusji ze studentem w ramach tego zagadnienia, zadając również dodatkowe pytania.

Lista zagadnień będzie aktualizowana w miarę zmian treści programowych realizowanych na WF UW.

1. Rozwiązywanie elektronowego równania Schrödingera z wykorzystaniem przybliżonej metody Hartree-Focka-Roothana (*SCF-LCAO*) dla układów atomowych i molekularnych.
2. Przybliżenie π -elektronowe w metodzie Huckela dla równań *SCF-LCAO*.
3. Metody wyznaczania energii korelacji (*post-SCF*) dla układów atomowych i molekularnych.
4. Podział energii oddziaływania układów molekularnych w przybliżeniu polaryzacyjnym. Podać przybliżoną interpretację fizyczną poszczególnych wkładów.

5. Mikroskopowy (na atomowym poziomie) opis energii potencjalnej układów (bio)molekularnych i nanoukładów w mechanicznym modelu (bio)molekuł.
6. Gruboziarnisty (na mezoskopowym poziomie) opis energii potencjalnej układów (bio)molekularnych i nanoukładów w mechanicznym modelu (bio)molekuł.
7. Energia wewnętrzna oraz energia swobodna w fizyce statystycznej. Opisać jedną z wybranych metod symulacji pozwalających na wyznaczanie tych energii dla układów atomowych lub molekularnych.
8. Związek stałej równowagi między stabilnymi stanami układów (bio)molekularnych oraz energii swobodnej tych stanów.
9. Szacowanie szybkości przejść pomiędzy stabilnymi stanami strukturalnymi układów (bio)molekularnych z wykorzystaniem modelu Arrheniusa lub jego uogólnień.
10. Podstawy metod dynamiki molekularnej (MD) w badaniach układów (bio)molekularnych i nanoukładów. Opisać symulowane lub obserwowane eksperymentalnie skale czasowe ruchów wewnątrz-molekularnych.
11. Podstawy metod Monte-Carlo (MC) w badaniach układów (bio)molekularnych i nanoukładów. Przykłady zastosowań.
12. Struktura przestrzenna i elektronowa grafenu lub nanorurek (do wyboru) oraz ich potencjalne zastosowania.
13. Wyznaczanie struktur przestrzennych biopolimerów z rozdzielczością atomową na podstawie wybranej metody, eksperymentalnej lub teoretycznej.
14. Współczesne metody wizualizacji 3D oraz wirtualnej rzeczywistości w badaniach układów (bio)molekularnych, nanoukładów i układów (bio)medycznych. Przykłady zastosowań.
15. Równanie Fockera-Plancka – postać, interpretacja i wybrane zastosowania.
16. Problem fazowy w rentgenografii i metody jego rozwiązywania.
17. Podstawy fizyki wiązania wodorowego. Wykorzystanie tej fizyki do opisu komplementarności zasad kwasów nukleinowych.
18. Fizyczne modele otoczenia molekularnego (m.in. roztworu) badanego układu używane w komputerowych symulacjach metodami dynamiki molekularnej lub Monte-Carlo.
19. Metody teoretyczne pozwalające na badania mechanizmów reakcji (bio)chemicznych. Ilustracja zagadnienia na podstawie wybranego przykładu.
20. Porównywanie sekwencji biopolimerów (*multiple-alignment*) z wykorzystaniem wybranej bioinformatycznej metody. Opisać jej schemat.
21. Zmienność genomu - mutageneza, naprawa DNA i rekombinacja.

22. W jaki sposób można zmienić powinowactwo „molekuły leku” do miejsca jego działania w biomolekularnym „targcie”?
23. Na jakich założeniach opierają się metody komputerowego przewidywania struktury białek?
24. Co to są metody modelowania wielowymiarowych zależności QSAR (*Quantitative Structure- Activity Relationship*)? Porównać znane metody.
25. Jakie oddziaływania fizyczne decydują o stabilności struktury białka, a jakie o stabilności struktury kwasów nukleinowych ? Opisać te oddziaływania w przybliżony sposób.
26. Opisać procedurę modelowania homologicznego biopolimerów, np. białek.
27. Modelowanie rzeczywistości i projektowanie systemów informacyjnych.
28. Scharakteryzować paradygmaty programowania.
29. Co to oznacza pojęcie "*data-mining*" ? Wymienić i krótko scharakteryzować metody i algorytmy przetwarzania i analizy dużych zbiorów danych.
30. Jakie wymagania musi spełniać system zarządzający bazą danych? Wymienić i krótko scharakteryzować modele baz danych.